

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ В ВАРИАЦИОННОЙ ПОСТАНОВКЕ

Процесс сорбции – это поглощение твердым телом или жидкостью жидкого вещества или газа из окружающей среды. Прямая задача динамики сорбции заключается в том, чтобы, зная исходные концентрации веществ в смеси, найти функции распределения веществ в сорбирующей среде для любого момента времени. Решение же обратной задачи идентификации изотермы сорбции при фильтрации примеси в пористой среде заключается в том, чтобы найти исходный состав смеси и концентрации, определив экспериментально распределение веществ в сорбирующей среде. Изотерма сорбции – это функция пространственно-временного распределения сорбируемых веществ в сорбирующей среде, она является функцией концентрации примеси.

Работа посвящена численному решению задачи идентификации изотермы сорбции при фильтрации примеси в пористой среде в вариационной постановке. В ней рассматривается равновесная динамика сорбции одного вещества. Перенос примеси потоком фильтрующей жидкости с сорбцией примеси в пористой среде описывается уравнением в безразмерных координатах с соответствующими начальными и граничными условиями [1]. Вариационная постановка задачи идентификации изотермы сорбции $f(C)$ формулируется как задача оптимального управления. Функция цели имеет вид

$$J = \int_0^T (C(l, t) - \varphi(t))^2 dt,$$

где $C(l, t)$ – вычисленное значение функции концентрации примеси на границе сорбционной колонки $x=l$, $\varphi(t)$ – ее замеренное значение. Уравнение динамики сорбции выступает в качестве связи при построении Лагранжиана. Формулируется сопряженная краевая задача. При решении задачи идентификации изотерма сорбции представляется в параметрическом виде через базисные функции-крышки. Градиент функционала J минимизируется на решениях сопряженной краевой задачи.

В данной работе исследована и решена модельная задача идентификации изотермы сорбции $f(C)$. Функция $f(C)$ задается в параметрическом виде: $f(C) = \Gamma \cdot C$. Функционал цели J минимизируется на решениях прямой краевой задачи. Решение прямой краевой задачи при различных параметрах Γ и получение значений функции $C(x, t)$ в

заданной области проводятся численно и аналитически. Аналитическое решение получено методом характеристик. При численной реализации применяется метод конечных разностей и итерационный метод Зейделя верхней релаксации. Программа, реализующая численные алгоритмы, составлена на языке Turbo Pascal 7.0. Представлены графики функций $f(C)$ и $C(l,t)$ при различных значениях параметра Γ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Рачинский В.В. *Введение в общую теорию динамики сорбции и хроматографии*. – М.: Наука, 1964.

А. Ю. Шкарбан (Казань)

ГИДРОДИНАМИКА ТЕЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОЛИТА ПРИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМ ХОНИНГОВАНИИ С УЧЕТОМ ЗОНЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ

Решена задача по расчету анодной границы и гидродинамики течения электролита в межэлектродном промежутке при стационарной электрохимической обработки специальным хонинструментом. При расчете анодной границы учитывалось наличие зоны локализации анодного растворения металла. Математическое решение задачи по ее расчету осуществлено методом годографа [1].

Выполнен расчет гидродинамических линий тока и поля давления при моделировании течения электролита идеальной несжимаемой жидкостью. Для этого использовано следующее выражение функции, обратной к функции комплексного потенциала

$$x + iy = c \int_1^{\varphi + i\psi} \frac{1}{\sqrt{v-1}} \prod_{i=1}^2 \frac{1}{\sqrt{v-a_i}} \int_0^v \frac{(u-a_7)}{\sqrt{u(u-1)}} \prod_{j=1}^4 (u-b_j) \prod_{i=3}^6 \frac{1}{\sqrt{u-a_i}} du dv$$

где a_i – математические параметры задачи связанные с геометрией хона-инструмента, b_j и c – находятся из условия соответствия точек областей.

Также выполнен расчет вязких напряжений на анодной границе. Результаты расчета вязких напряжений представлены на рисунке

Производится расчет траектории движения продуктов реакции в межэлектродном промежутке из области подтравливания под изоляцию. Проведенные расчеты показали, что в указанной области торможения скорость потока мала, и расчет можно выполнить в так называемом акустическом приближении. Продукты реакции моделируется